

аналогов, но имеет сходство с другими Ni сверхпроводниками LaNiPO , LaNiBiO .

Основной вклад в прифермиевскую область для $\text{Sr}_4\text{Sc}_2\text{Ni}_2\text{Pn}_2\text{O}_6$ вносят Ni 3d состояния при участии Pn p состояний. При этом все 5 орбиталей Ni 3d и 3 орбитали Pn p имеют ненулевой вклад на уровне Ферми, что не совпадает с результатами для Fe фаз. Полные плотности состояний на уровне Ферми $N(E_F)$ сравнимы с такими для Fe фаз и составляют 3.13 и 3.85 сост./эВ/форм.ед. соответственно. Кроме того, установлено, что Ni фазы немагнитны.

Межатомные взаимодействия в Ni фазах носят комбинированный металлически-ионно-ковалентный тип. Взаимодействие между блоками Fe_2Pn_2 , $\text{Sr}_4\text{Sc}_2\text{O}_6$ имеет ионный характер, соответствующий электронный перенос, как следует из вычислений атомных зарядов по схеме Бейдера, составляет около 0.6 е/форм.ед. В то же время внутри этих блоков реализуются все три составляющие химической связи.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты 09-03-00946 и 10-03-96008-Урал.

СТРУКТУРНЫЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СЛОЖНО-ЗАМЕЩЕННЫХ НИОБАТОВ ВИСМУТА

Тарасова О.А., Шатохина А.Н.

Уральский государственный университет
620000, г. Екатеринбург, пр. Ленина, д.51

Ниобаты висмута являются достаточно интересным классом соединений, физико-химические свойства которых изучаются большим количеством исследователей в различных научных центрах. Наибольшее внимание в системе оксид висмута - оксид ниобия в последние годы уделяется сложным оксидам из области, обогащенной оксидом висмута. Путем целенаправленного допирования проводится поиск фаз, обладающих максимальной кислородно-ионной проводимостью и устойчивостью в широком температурном интервале.

Настоящая работа посвящена изучению кристаллической структуры и физико-химических свойств допированных ниобатов висмута состава $\text{Bi}_{6,95}\text{Y}_{0,05}\text{Nb}_{2-y}\text{Me}_y\text{O}_{15,5}$ где $\text{Me}=\text{Fe}, \text{Zr}, \text{V}$. Образцы были синтезированы по стандартной керамической технологии в интервале составов $0.1 \leq y \leq 0.5$ с шагом 0.1. Конечная температура синтеза составила 820°C .

Фазовый состав и кристаллическую структуру определяли рентгенографически, размер зерен порошков – методом лазерной дифракции. По результатам рентгенографического анализа было установлено, что ниобаты, допированные Fe или Zr образуют твердые растворы во всем

исследованном концентрационном интервале, в то время как допирование V ограничено концентрацией $y=0.2$. Подобно незамещенному ниобату $\text{Bi}_7\text{Nb}_2\text{O}_{15.5}$, кристаллическая структура полученных твердых растворов описана в рамках кубической ячейки (Пр. гр. $Fm3m$).

Электропроводность образцов как функцию состава и температуры в интервале $800\text{--}300^\circ\text{C}$ исследовали методом импедансной спектроскопии. Построены типичные годографы импеданса, подобраны эквивалентные схемы ячеек. Температурные зависимости общей электропроводности для образцов состава $\text{Bi}_{6.95}\text{Y}_{0.05}\text{Nb}_{1.8}\text{Me}_{0.2}\text{O}_{15.5}$ представлены на рис. 1. Выявлено, что наибольшим значением проводимости обладает серия твердых растворов, в которой допантом является железо.

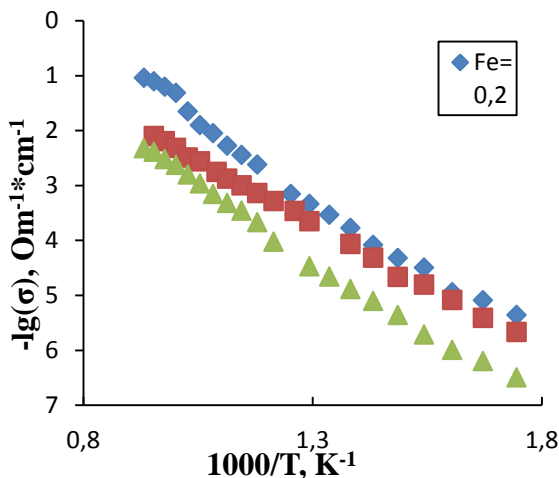


Рис.1 Температурные зависимости общей электропроводности для образцов состава $\text{Bi}_{6.95}\text{Y}_{0.05}\text{Nb}_{1.8}\text{Me}_{0.2}\text{O}_{15.5}$

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».